

文章编号: 0258-7025(2008)08-1255-05

激光强化渗氮过程的数值模型及分析

曹丽琴 轩福贞 王正东 涂善东

(华东理工大学机械与动力工程学院, 上海 200237)

摘要 根据傅里叶传热方程和修正的非克定律,建立了瞬态激光氮化温度场和浓度场的耦合模型,考虑移动热源形成的温度梯度对氮扩散的影响。有限元模拟分析了激光氮化工艺过程温度场和浓度场的分布规律。结果表明,严格控制氮化温度,反复调整热流密度和扫描速度,得到各自的临界值,可作为工艺可调参考范围。修正的扩散方程考虑了温度梯度对氮扩散的影响,较真实地反映了激光热作用下氮的扩散过程,得到了整个氮化层的厚度。区别于常规氮化工艺,激光氮化扩散的主动力是高的表面温度梯度,浓度梯度的影响减弱。增大热流量和降低扫描速度,都将使氮化深度增加,但参数的选择太高或太低,均得不到高质量的氮化结果。

关键词 激光技术;激光氮化;温度场;氮扩散;数值模拟

中图分类号 TN 249 文献标识码 A doi: 10.3788/CJL20083508.1255

Numerical Model and Simulation for Laser-Intensified Surface Nitriding

Cao Liqin Xuan Fuzhen Wang Zhengdong Tu Shandong

(School of Mechanical & Power Engineering, East China University of Science & Technology, Shanghai 200237, China)

Abstract Finite-element models of the temperature coupled the concentration of kinetics during laser nitriding were considered. Coupled calculations of the non-steady state Fourier heat conduction equation and the Fick law of modified diffusion equation showed the variation and distribution of nitrogen concentration and the temperature in the metal surface layer. The results indicate that, the temperature of laser nitriding can be controlled exactly to gain the critical values of the heat flux and scanning rate respectively by trial-and-error, as the applicable reference range of progress. The modified diffusion equation, which considered the temperature gradient and thus showed a fairly good explanation of the N diffusion using the high-energy laser to fill the heat. The whole thickness of nitrides layer can be obtained through the simulation. The dynamic of laser nitriding is the high surface temperature gradient, which differs from the conventional process. The nitrogen concentration gradient is never considered as the main influence element. The thickness of nitrides increases when heat flux is increased or the scanning rate is reduced. Simulation indicates that good results can be obtained when these parameters are chosen properly.

Key words laser technique; laser nitriding; temperature field; nitrogen diffusion; numerical simulation

1 引言

激光强化渗氮工艺在氮气气氛中利用高能激光束照射基体,使基体材料表层快速熔化,同时氮元素与熔池中的金属液体快速混合凝固,获得高硬度渗氮层,使廉价的普通材料表面获得有益的耐磨、耐蚀等性能,是近些年来发展起来的很有前途的表面改性技术。

杨森等^[1]利用中心对称的特点,建立了激光表面熔凝二维稳态热传导模型;王云山等^[2]分析了扫描光斑温度场的分布情况;席明哲等^[3]建立了连续移动三维瞬态激光熔池温度场的计算模型;高昕等^[4]用有限差分法对脉冲激光氮化过程的温度场进行了三维模拟计算;贾文鹏等^[5]针对空心叶片的激光快速成形过程的温度场进行了研究。黄峰等^[6]通

收稿日期:2007-10-23;收到修改稿日期:2007-11-22

基金项目:上海市重点学科建设项目(B503)资助课题。

作者简介:曹丽琴(1982—),女,河北人,博士研究生,主要从事激光应用、激光与物质相互作用的研究。

E-mail:clqzhs@163.com

导师简介:轩福贞(1970—),男,山东人,教授,博士生导师,主要从事先进过程装备设计理论和寿命可靠性技术研究。

E-mail:fzxuan@ecust.edu.cn

过积分变换求解三维热传导方程,得出了激光辐照引起的瞬态温度场分布的解析解。与温度场模型相比,在激光热作用下质扩散的研究甚少^[7,8],并且大部分都是通过菲克(Fick)定律围绕扩散系数的测定展开的,只考虑浓度梯度对扩散的影响。但 Fick 定律严格成立的条件是等温,而激光氮化工艺中的扩散过程远非等温过程,在同一体积内,热流和物质流相互作用。本文在修正的扩散方程下,模拟移动热源温度场和浓度场耦合作用,为实验规划、确定最优工艺参数提供参考。

2 热传导和扩散耦合模型

2.1 热传导模型

激光能量被材料表层吸收转化成热量,通过热传导在基体内部扩散,形成温度场。热传导方程描述为^[9]

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T),$$

式中 ρ, c, k 分别为密度、比热容和传热系数。

初始条件:

$$T = T_0, \quad t = 0$$

(T 为渗氮温度, T_0 为环境初始温度)。

边界条件:

$$k \frac{\partial T}{\partial n} = q \quad y = 0, x \in \text{光斑区域}, t > 0$$

$$T = T_0, \quad y = -L(\text{底面})$$

$$k \frac{\partial T}{\partial n} = 0, \quad \text{其他边界}$$

式中 $\partial T / \partial n$ 为温度沿表面外法线方向的偏导数; q 为输入边界的热流密度。

2.2 氮元素扩散模型

气氛渗氮是一个非稳态扩散过程,在高的温度梯度和浓度梯度同时存在的情况下,修正的扩散模型^[10]为

$$\frac{dC}{dt} = \nabla \cdot (D \cdot \nabla C) + DS_T (\nabla C \cdot \nabla T),$$

式中 C 为氮的浓度, D 为扩散系数,服从阿赫纽斯(Arrhenius)公式, $D = D_0 \exp(-Q/RT)$, T 为热力学温度; D_0 为前置常数; Q 为扩散激活能; R 为气体常数; S_T 为索雷(Soret)系数。

假定材料基体中氮含量为零。整个渗氮过程中,金属表面与气氛接触快速形成一个稳定的氮化薄层,氮含量在此层达到饱和并保持不变;氮的扩散系数在相的均匀性范围不变^[11]。

初始条件:

$$C = C_0 = 0;$$

边界条件:

$$C|_{y=y_{\max}} = C_0 = 0, \quad C|_{y=0} = C_g,$$

式中 y_{\max} 为最大渗氮深度(由于实际渗层深度未知,选取模型底面); C_g 为表面含氮量。

3 有限元模型及参数

根据以上模型,借助 comsol 软件,模拟连续激光氮化工艺过程。基于有限元的离散思想,激光束能量作为一外加热流矢量 q 输入(以速度 v 移动的光斑区域内热流均匀分布)。其作用位置随时间连续变化:即在 $vt < x < vt + d$ (d 为光斑直径)区域内,热流输入为 q 。调整 q 和速度 v 模拟得到不同工艺参数下激光束的连续扫描过程。

由于计算机容量和计算机时的限制,不可能对整个工件建立网格进行数值求解,模型中所用的计算区域为沿运动方向纵剖面 $10 \text{ mm} \times 10 \text{ mm}$ (5 个光斑直径,光斑半径为 1 mm)。如图 1 所示,激光平行于 y 轴从 $(0, 0)$ 处垂直上表面入射,沿 x 轴正方向以速度 v 匀速运动, y 轴竖直向上。由于激光氮化主要发生在表面,采用不均匀网格划分,上表面网格划分较细,空间步长 0.01 mm ,生成 14403 个单元格。扩散系数 $D = 0.12 \exp(-45200/1.98T)$ ^[12] (单位 cm^2/s , T 单位为 K),其他参数为:初始温度 $T_0 = 300 \text{ K}$,传热系数 $k = 20.4 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$,密度 $\rho = 4570 \text{ kg}/\text{m}^3$,比热容 $c_p = 523 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$ 。

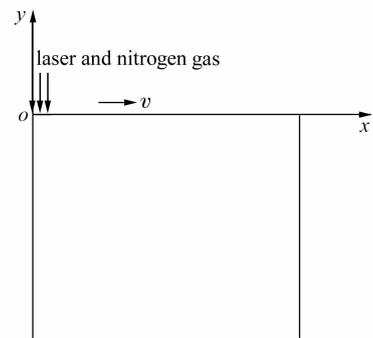


图 1 激光氮化工艺示意图

Fig. 1 Illustration of laser gas nitriding

4 结果及讨论

4.1 温度场

调整激光的入射参数,按照不同的工艺需要,选择适当的加热量。但这个过程的实现如果通过单纯的反复试验来完成,需要至少 30 个不同的试验来得到一个较合适的工艺参数^[13]。为节约试验经费,方

便、快捷地得到可重复高质量的工艺条件,可以借助有限元方法,利用计算机对激光氮化温度场进行数值模拟,得到工艺参数的选择范围。

激光气体氮化的机制在于:激光使金属表层熔化,在氮气气氛中活性氮进入熔体,从而使氮元素渗入基体表层,达到氮化的目的。激光在氮化过程中作为热源对基底样品进行加热形成液相主扩散区,金属表面温度达到: $T_m < T < T_g$ ^[14],其中 T_m 为基体表面熔化温度(模拟取为1960 K); T_g 为气化温度(模拟取3560 K)。温度低于 T_m 时,表面不能形成激光熔池;但温度太高超过基体沸点,就会将表层金属气化甚至电离,影响激光使用效率和氮化效果。

4.2 温度场影响因素

热流密度 q 保持不变,反复调整输入的扫描速度,严格控制氮化温度,使表面温度恰为熔点和沸点,得到临界扫描速度 v_g (表面温度恰为材料熔点时的速度)和 v_m (表面温度恰为材料沸点时的速度)。

图2(a)和(b)分别为 $q = 4 \times 10^7 \text{ W/m}^2$ 时的临界表面温度和临界温度梯度分布图。得到 $v_g = 24 \text{ mm/s}$, $v_m = 3 \text{ mm/s}$ 。增大扫描速度,基体温度明显降低,液相存在时间明显缩短(即液相溶池寿命缩短);临界速度范围内扫描速度对温度梯度影响很

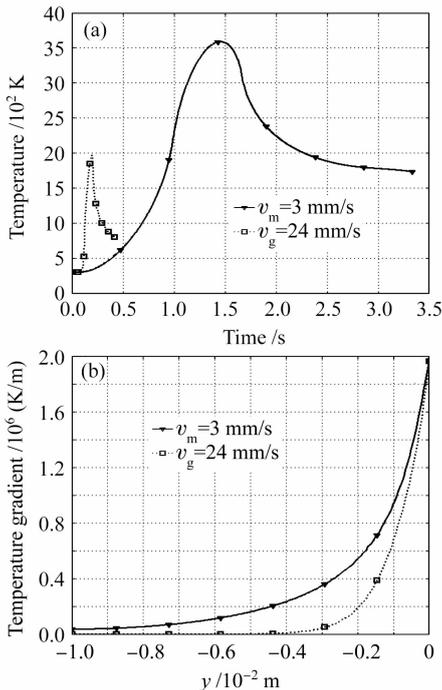


图2 $q = 4 \times 10^7 \text{ W/m}^2$ 时,临界表面温度(a)和温度梯度(b)分布图

Fig. 2 Distribution of critical temperature (a) and temperature gradient with $q = 4 \times 10^7 \text{ W/m}^2$

小。扫描速度越快,温度梯度变得更陡;沿深度方向表面的温度梯度最大,可达 10^6 K/m 量级。

选定扫描速度为 10 mm/s ,改变输入基体热流密度的大小,使其满足液相温度范围。图3(a)为表面上中心位置处温度随时间的变化分布情况。结果表明仅从温度要求考虑,热流密度适用范围为 $2.88 \times 10^7 \sim 5.69 \times 10^7 \text{ W/m}^2$ 。图3(b)为表面中心位置处温度最高时刻深度方向的温度梯度分布。热流密度越大,表面温度梯度越高,对于氮的扩散越有利。

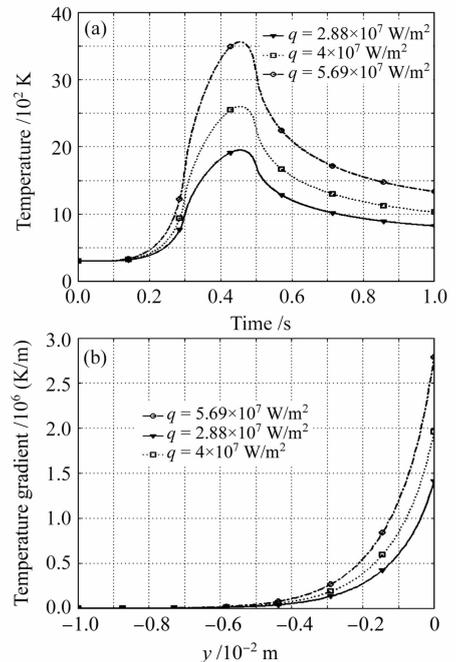


图3 $v = 10 \text{ mm/s}$,不同热流密度下温度场分布图

(a) 表面温度分布;(b) 深度方向温度梯度分布

Fig. 3 Distribution of temperature field for difference heat flux with $v = 10 \text{ mm/s}$, respectively. (a) surface temperature; (b) temperature gradient curve along the depth

4.3 氮的扩散

激光氮化区别于其他氮化方法最大的优点就是氮化速度快。修正的扩散方程较常温扩散方程考虑了温度梯度对扩散的影响。激光热源产生的表面温度梯度达 10^6 量级,对扩散的影响不容忽视。选取 $q = 4 \times 10^7 \text{ W/m}^2$, $v = 10 \text{ mm/s}$,比较两扩散方程对扩散的影响,代入耦合模型结果如图4所示。考虑温度梯度对氮扩散的影响时,氮的浓度在表面一定深度内保持不变,之后随着深度的增加而逐渐降低呈梯度变化;常规扩散方程模拟,氮的扩散从表层到扩散结束,只包含梯度变化阶段。钛经激光氮化处理后的截面形貌如图5所示^[15]。材料表层形成

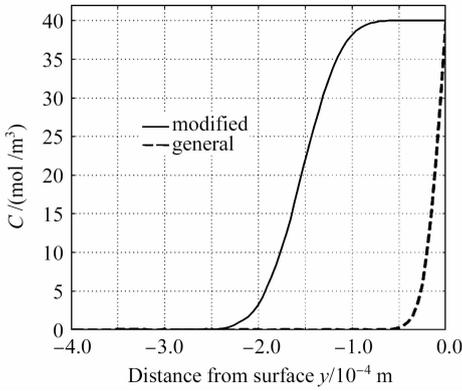


图 4 不同扩散方程氮浓度分布图

Fig. 4 Distribution of nitrogen using two diffusion equations respectively

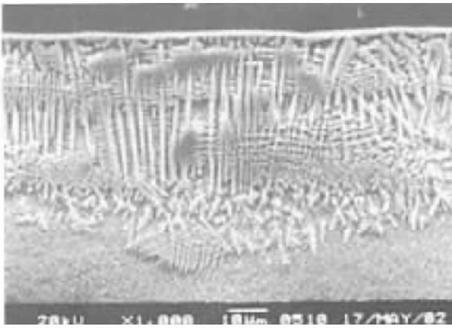


图 5 钛合金激光渗氮剖面扫描电镜形貌

Fig. 5 SEM micrographs of the cross section of titanium alloys by laser nitriding

一层氮化稳定层,即扫描电镜(SEM)图上的白亮层。该区域只含有 Ti 和 N 两种元素,靠近表面层约 30 μm 区域内的氮含量最高,向内逐渐降低。可见考虑温度梯度模拟的结果更真实地反映了氮的扩散过程,得到了整个氮化层的厚度,同时也验证了扩散假设的合理性。

4.4 氮的扩散影响因素

表面含氮量的大小取决于氮气流量、激光功率密度大小,与表面活性氮分压有关。 $q = 4 \times 10^7 \text{ W/m}^2$, $v = 10 \text{ mm/s}$ 时,表面氮浓度分别取 20 mol/m^3 , 40 mol/m^3 , 60 mol/m^3 和 100 mol/m^3 ,定性研究其对氮浓度分布的影响,如图 6 所示。表面氮浓度越高,渗层内氮的含量越高。与常规渗氮不同的是,氮化层厚度变化不明显。常规渗氮以浓度梯度为扩散动力,需要很长的扩散时间,浓度梯度大,扩散层深度增加;而激光氮化速度很快,与温度梯度相比,浓度梯度对氮扩散的影响很小。由此看出激光氮化工艺高的表面温度梯度是氮扩散的主动动力,保证了快速氮化的实现。

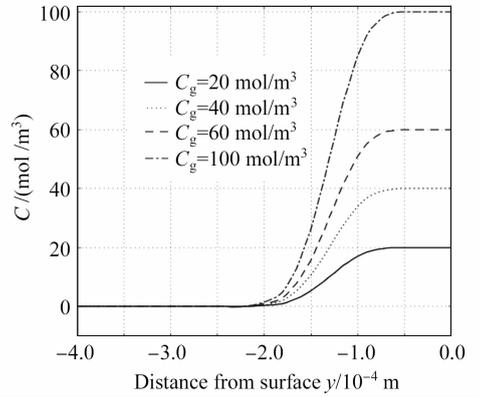


图 6 不同表面含氮量的氮浓度分布曲线

Fig. 6 Nitrided curves with different nitrogen concentrations on the surface

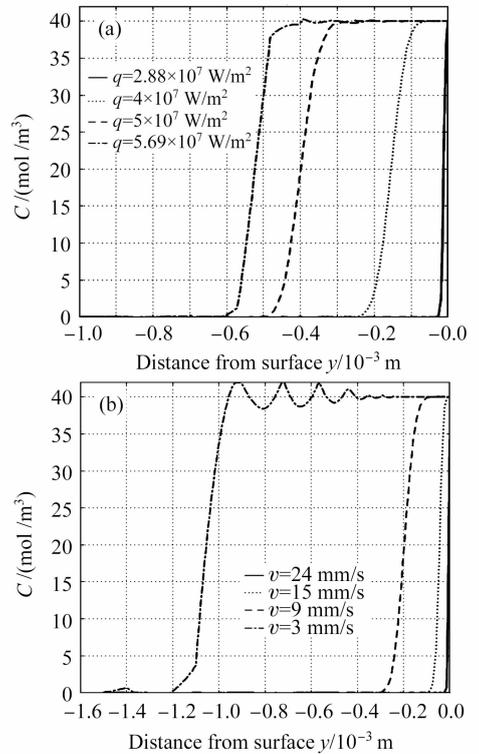


图 7 不同热流密度(a)和不同扫描速度(b)下氮的浓度分布图

Fig. 7 Distribution of nitrogen with different heat flux (a) and different scanning rates (b)

从扩散方程看,温度越高,扩散系数越大,扩散越快;温度梯度越高,氮化层厚度越大。在表面温度要求范围内,取定 $C_g = 40 \text{ mol/m}^3$, $v = 10 \text{ mm/s}$,分别取热流密度为 $2.88 \times 10^7 \text{ W/m}^2$, $4 \times 10^7 \text{ W/m}^2$, $5 \times 10^7 \text{ W/m}^2$ 和 $5.69 \times 10^7 \text{ W/m}^2$,得到氮浓度分布如图 7(a)所示。 $q < 2.88 \times 10^7 \text{ W/m}^2$ 时,激光不能使基体形成液相溶池,快速热作用使得固相中氮的扩散很难实现。 $q = 5.69 \times 10^7 \text{ W/m}^2$

时, 渗层深度最大, 可达到 0.6 mm。增大热流量, 溶池表面温度梯度增加, 强化了溶池中氮的扩散, 使氮化深度增加; 但是热流量太大, 导致凝固速度下降, 从而使凝固组织粗大, 氮化效果并不理想。

取定 $C_g = 40 \text{ mol/m}^3$, $q = 4 \times 10^7 \text{ W/m}^2$, 研究临界扫描速度内, 不同扫描速度对氮扩散的影响, 如图 7(b) 所示。在临界温度上氮化深度最高可达到 1 mm。扫描速度越快, 理论上工艺效率越高, 但是扫描速度太快, 氮还来不及与液相金属发生扩散, 基体就重新凝固, 有效氮化无法实现; 扫描速度的下降意味着溶池寿命增加, 有助于通过扩散在更大程度上使成分梯度下降, 但扫描速度太慢, 失去激光快速氮化的优点。

在激光气体氮化中, 总是希望有极快的氮化速度和极高的氮化层质量。这些要求是相互矛盾的, 不存在唯一的激光合金化工艺条件, 任何激光氮化工艺的选择都将受到其他因素的制约。

5 结 论

激光氮化温度场主要影响因素为热流密度和扫描速度。严格控制氮化温度, 反复调整输入参数, 使表面温度恰为熔点和沸点, 得到临界扫描速度 v_g 和 v_m 以及临界热流密度, 作为工艺可调参考范围。

修正的扩散方程考虑了温度梯度对氮扩散的影响, 氮的浓度在表面一定深度内保持不变, 之后随着深度的增加而逐渐降低呈现梯度变化, 较真实地反映了氮的扩散过程, 得到了整个氮化层的厚度。

增大热流量, 溶池表面的温度梯度增大, 氮化深度增加; 但是热流量太大, 导致凝固速度下降, 凝固组织粗大, 氮化效果并不理想。扫描速度太快, 氮还来不及与液相金属发生扩散, 基体就重新凝固, 有效氮化无法实现; 扫描速度下降, 溶池寿命增加, 有助于通过扩散在更大程度上使成分梯度下降, 但扫描速度太慢, 失去激光快速氮化的优点。不存在唯一的激光合金化工艺条件, 任何激光氮化工艺的选择都将受到其他因素的制约。

参 考 文 献

- 1 Yang Sen, Liu Zhenxia, Liu Wenjin *et al.*. Two-dimensional numerical model of temperature field during laser surface remelting [J]. *Applied Laser*, 2005, **25**(5):313~315
杨森, 刘振侠, 刘文今等. 激光表面熔凝温度场的二维数值模型[J]. *应用激光*, 2005, **25**(5):313~315
- 2 Wang Yunshan, Yang Xichen, Liu Yajun. Temperature field of laser scanning line facula [J]. *Chinese J. Lasers*, 2006, **33**(7): 981~986

- 3 王云山, 杨洗陈, 刘亚君. 激光扫描光斑温度场[J]. *中国激光*, 2006, **33**(7):981~986
- 3 Xi Mingzhe, Yu Gang. Numerical simulation for the transient temperature field of 3D moving laser molten pool [J]. *Chinese J. Lasers*, 2004, **31**(12):1527~1532
席明哲, 虞钢. 连续移动三维瞬态激光熔池温度场数值模拟[J]. *中国激光*, 2004, **31**(12):1527~1532
- 4 Gao Xin, Song Zhoumo. Numerical simulation of laser gas alloying for TiN films generated on titanium surface [J]. *Laser Journal*, 2000, **21**(2):62~63
高昕, 宋宙模. Ti 表面脉冲激光氮化成膜温度场的数值模拟[J]. *激光杂志*, 2000, **21**(2):62~63
- 5 Jia Wenpeng, Lin Xin, Chen Jing *et al.*. Temperature/stress field numerical simulation of hollow blade produced by laser rapid forming [J]. *Chinese J. Lasers*, 2007, **34**(9):1308~1312
贾文鹏, 林鑫, 陈静等. 空心叶片激光快速成形过程的温度/应力场数值模拟[J]. *中国激光*, 2007, **34**(9):1308~1312
- 6 Huang Feng, Niu Yanxiong, Wang Yuefeng *et al.*. Calculation of thermal and mechanical effect induced by laser in optical window materials [J]. *Acta Optica Sinica*, 2006, **26**(4):576~580
黄峰, 牛燕雄, 汪岳峰等. 光学窗口材料激光辐照热-力效应的解析计算研究[J]. *光学学报*, 2006, **26**(4):576~580
- 7 M. Von Allmen. Translated by Qi Haibin, Hu Hongbo, Xie Bailin *et al.*. *Laser Beam Interaction with Materials Physical Principles and Applications* [M]. Beijing: Science Press, 1994. 83~85, 112~115
M. Von 奥尔曼著. 漆海滨, 胡洪波, 谢柏林等译. *激光束与材料相互作用的物理原理及应用* [M]. 北京: 科学出版社, 1994. 83~85, 112~115
- 8 Peter Schaaf. Laser nitriding of metals [J]. *Progress in Materials Science*, 2002, **47**:1~161
- 9 Zheng Qiguang. *Laser Advanced Manufacture* [M]. Wuhan: Huazhong Univerdity of Science and Technology Press, 2002. 34~40
郑启光. *激光先进制造技术* [M]. 武汉: 华中科技大学出版社, 2002. 34~40
- 10 Wang Jiajin. *Laser Processing Technology* [M]. Beijing: China Metrology Press, 1992. 119~121
王家金. *激光加工技术* [M]. 北京: 中国计量出版社, 1992. 119~121
- 11 B. S. Yilbas, C. Karatas, Uslan O. Keles *et al.*. CO₂ laser gas assisted nitriding of Ti-6Al-4V alloy [J]. *Applied Surface Science*, 2006, **252**:8557~8564
- 12 B. S. Yilbas, S. Z. Shuja, M. S. J. Hashmi. A numerical solution for laser heating of titanium and nitrogen diffusion in solid [J]. *Journal of Materials Processing Technology*, 2003, **136**:12~23
- 13 A. I. P. Nwobu, R. D. Rawlings, D. R. F. West. Nitride formation in titanium based substrates during laser surface melting in nitrogen-argon atmospheres [J]. *Acta Mater.*, 1999, **47**(2):631~643
- 14 Yang Yuling, Sun Fengjiu, Zhang Duo. Laser nitridation technics and the mathematical simulation of laser temperature field on the surface of Ti in atmospheric ambient [J]. *Laser Technology*, 2005, **29**(2):201~204
杨玉玲, 孙凤久, 张多. 大气气氛下 Ti 表面激光氮化及其温度场的计算[J]. *激光技术*, 2005, **29**(2):201~204
- 15 Yu Yongsi, Zhao Qun, Zhang Liwen *et al.*. Structure and property of nitriding layer on titanium alloy by laser [J]. *Heat Treatment of Metals*, 2003, **28**(12):21~24
于永泗, 赵群, 张立文等. 钛合金激光渗氮层的组织与性能研究[J]. *金属热处理*, 2003, **28**(12):21~24